

рис. 2. Фононный спектр Cu_7Te_4

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-80007.

Список публикаций:

[1] USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography) [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <https://uspeh-team.org>.

[2] Quantum-ESPRESSO [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.quantum-espresso.org>.

Расчет фононного спектра халькогенидов меди и серебра

Курбангулов Азат Рифкатович

Цыганкова Ляйсан Валиуловна, Сафаргалиев Данир Ильдарович

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета

Биккулова Нурия Нагимьяновна, д.ф.-м.н.

azatkurbanstr@mail.ru

В данной работе приводятся результаты исследований методом неупругого рассеяния нейтронов халькогенидов меди и серебра при температуре 300 К в несуперионной фазе. Для изучения динамики решетки суперионных проводников эффективным является метод неупругого рассеяния медленных нейтронов. Получены динамические структурные факторы и обобщенные плотности фононных состояний данных соединений.

Обработка экспериментальных данных проводилась с использованием стандартных программ обработки нейтронных спектров. Для каждого из спектров вычислялся спектр частот $G(\varepsilon)$ по формуле (1) для дважды-дифференциального сечения однофононного некогерентного рассеяния нейтронов:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{\sigma}{4\pi} \sqrt{E/E_0} e^{-2W} \frac{\hbar^2 Q}{2M} \frac{G(\varepsilon)}{\varepsilon(1 - e^{-\varepsilon/kT})}, \quad (1)$$

где Q – передача импульса нейтрона, e^{-2W} – фактор Дебая-Уоллера, M – масса ядра.

Для улучшения статистической точности спектры суммировались по нескольким углам рассеяния для каждой группы детекторов.

Важность низкоэнергетических мод, которые дают основной вклад в тепловое движение из-за высокой плотности состояний и низкой энергии активации, является общепризнанным [1–4].

Получены обобщенные плотности фононных состояний Cu_2Te , Cu_2S и Ag_2Te (рис. 1). Фононные спектры исследованных соединений имеют особенности, характерные для структурно-разупорядоченных соединений.

Плотности фононных состояний $G(\varepsilon)$ для исследованных халькогенидов характеризуются недебаевским поведением в области малых энергий и выраженными максимумами при комнатной температуре с энергией

$\varepsilon \sim 10$ мэВ для Cu_2Te и Cu_2S , энергией $\varepsilon \sim 8$ мэВ для Ag_2Te . Низкоэнергетические возбуждения наблюдаются у всех соединений в виде отдельных максимумов при $\varepsilon \sim 3\text{--}5$ мэВ.

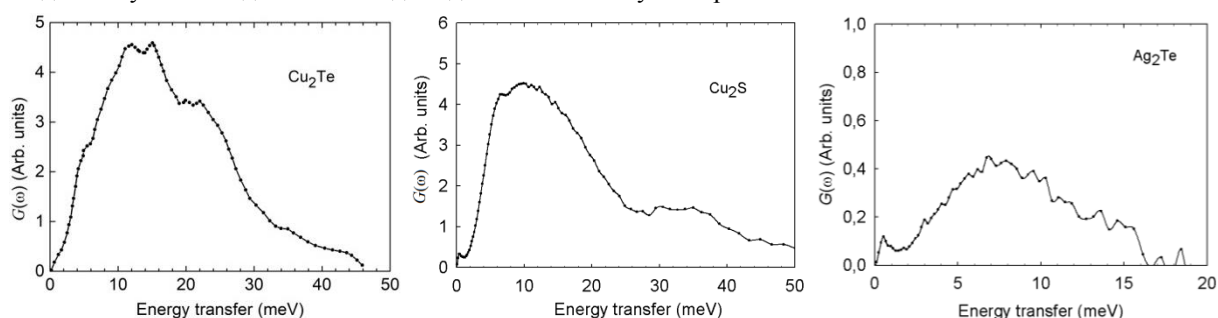


рис.1. Плотности фоновых состояний $G(\omega)$ при комнатной температуре соединений Cu_2Te , Cu_2S и Ag_2Te

Модельный расчет фононного спектра теллурида серебра Ag_2Te (рис. 2) был выполнен в рамках теории функционала электронной плотности с помощью метода псевдопотенциала в базе плоских волн, реализованный в программном пакете Quantum Espresso [5]. При расчете были использованы ультрамягкие псевдопотенциалы для серебра, для теллурида псевдопотенциалы сохраняющие норму, которые сгенерированы данной программой [6]. Энергия обрезки плоских волн имела величину 85–100 Ry. При расчетах данным методом учитываются валентные электроны атомов. Использовался автоматический выбор точек обратной решетки (k-точек) при помощи метода Монкхорста-Пака на сетке $8 \times 8 \times 8$.

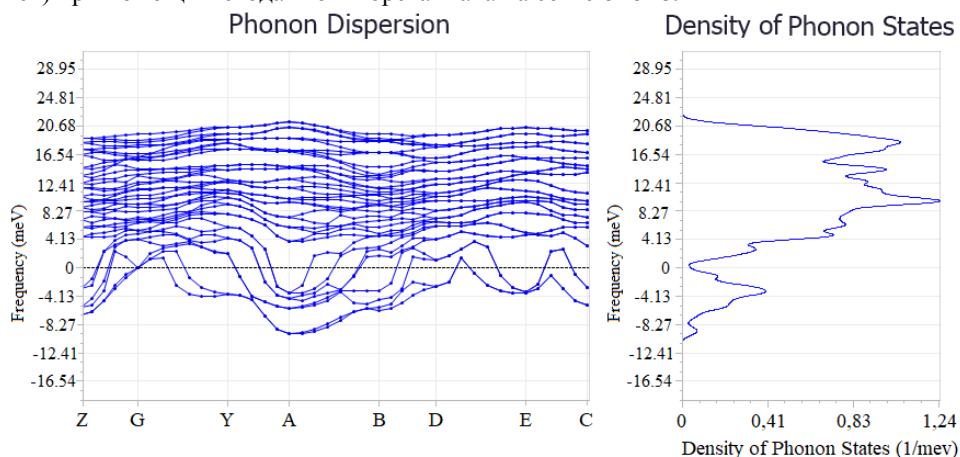


рис. 2. Фононный спектр Ag_2Te

Для этих соединений характерен анизотропный характер колебаний и, по-видимому, гармоническое приближение, используемое при расчетах, приводит к появлению отрицательных частот в фононном спектре. Этот факт можно использовать как один из возможных критериев для оценки и предсказания наличия ионной проводимости в соединениях.

«Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00675».

Список публикаций:

- [1] Данилкин С.А., Биккулова Н.Н., Семенов В.А., Ядровский Е.Л., Ягафарова З.А., Гареева М.Я. Низкочастотные колебательные моды в суперионном проводнике $\text{Cu}_2\text{-xSe}$ // Вестник Башкирского университета. 2000. № 1. С. 33.
- [2] Биккулова Н.Н., Степанов Ю.М., Биккулова Л.В., Курбангулов А.Р., Кутлов А.Х., Карагулов Р.Ф. Размытый фазовый переход из суперионного в несуперионное состояние в монокристалле $\text{Cu}_1.8\text{Se}$ // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 4. С. 603.
- [3] Kikuchi H., Iyetomi H., Hasegawa A. Insight into the origin of superionic conductivity from electronic structure theory // J. Phys. Condens. Matter. 1998. V. 10, P. 11439–11448.
- [4] Davletshina A.D., Yakshibaev R.A., Bikkulova N.N., Stepanov Yu.M., Bikkulova L.V. Ab initio calculations of band structure of solid solutions of copper and silver chalcogenides // Solid State Ionics. 2014. V. 257. P. 29–31.
- [5] Quantum-ESPRESSO [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.quantum-espresso.org>.
- [6] PseudopotentialsDatabase [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.pwscf.org>.